铜氧化物超导体的高温超导机制与动力学理论

古家朴
中国 重庆 (400039)
E-mail：gjp02565@yahoo.com.cn

摘 要：本文将高温超导体中的强耦合关联与电磁场作用相类比，引入了耦合关联强度与耦合关联能量体密度两个重要概念。并引入假设，描述其短程有序状态下的耦合关联强度与凝聚态物质密度的数学关系。本文分析了超导相分离过程中所存在的各种竞争序能量关系，推导出了铜氧化物超导体的竞争序动力学结构方程，从而建立起关于铜氧化物超导体的高温超导机制与理论，该理论能用数学方程推导出当前铜氧化物超导体的所有重要实验现象与规律。如欠掺杂与过掺杂现象、赝能隙、“0.19 附近”的量子临界点现象、反铁磁关联加强效应、反常同位素效应，以及压力效应等，本文给出了系统而全面的数学分析。

关键词： 耦合关联 高温超导 动力学理论

1. 引 言

人们在探索高温超导机制的过程中，发现铜氧化物超导体中存在着相分离现象，其超导相与反铁磁相在母体中共存[1]。在大量的实验现象中可归纳出如下四点重要规律：

（Ⅰ）欠掺杂与过掺杂现象规律：

即载流子浓度的过多或过少都不利于提升超导临界温度（Tc），而存在着最佳浓度[2]。在高温超导相图中，其 Tc 与载流子浓度 x 的关系表现为开口向下的类抛物线型曲线（如图 1）：

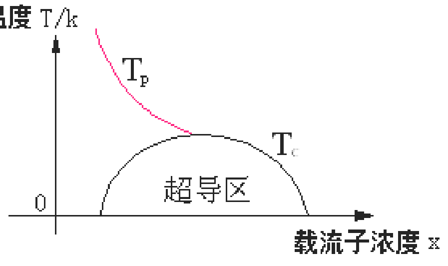

图 1 超导临界温度 T_c 与载流子浓度 x 的关系

与载流子浓度 x 相关的实验现象还有欠掺杂区内存在的赝能隙现象[3]（在图 1 中以红色 Tp 曲线所示），以及掺杂量为 0.19 附近存在的量子临界点现象[4]。

（Ⅱ）反铁磁关联增强效应规律：

在反铁磁关联增强的情况下，相分离温度提高；其超导电性也能够在平均载流子浓度很低的情况下出现[1][5]。即反铁磁关联的增强有利于 Tc 的提高。

（III）新同位素效应规律：

高温超导现象中存在着不寻常的新同位素效应：其欠掺杂区的同位素效应很明显，最佳掺杂区的同位素效应变小，而在过掺杂区却反常为负[6]。

（Ⅳ）压力效应规律：

对电子掺杂型超导体，Tc 与压力无关或随压力的增加而降低；空穴掺杂型超导体的 Tc 一般随压力的增大而提高，或成非线性关系，即当 Tc 达到极大值后，若继续增压，则 Tc 或保持不变或下降[7]。

其压力效应（对 Tc 的影响）和同位素效应之间还存在着密切的联系[3]。

上述总结作为一种实验性规律，在笔者著作本文之前，尚没有一个系统的理论能全面包容上述实验现象并对此作出统一的数学推导。

而本文将相分离过程中的强耦合关联与电磁场类比，引入耦合关联强度及耦合关联场能量体密度的新概念，结合当前人们对高温超导体相分离的现有认识，用能量体密度的概念建立起铜氧化物高温超导机制的宏观动力学理论，根据该理论，可用数学的方法系统地推导出高温超导体的上述实验规律，并作出系统的数学分析。

本文所建立的理论体系，其意义不仅在于从理论上揭示了高温超导的动力学机制，而且对高温超导体的工业化制备具有了系统而全面的实际指导意义。

2. 基本假设与新概念

2.1 耦合关联强度的概念引入

在相分离的形成过程中，其反铁磁相的短程有序和超导相的载流子凝聚都表征为很强的库仑耦合关联。

为此，可将该库仑耦合关联与电磁场作用相类比，引入与电磁场强度 E、H 相对应的耦合关联场强度概念，记为矢量 P。

因此，在定义相分离形成时的强关联程度时，可用耦合关联强度 P 加以描述。

2.2 耦合关联场强度的叠加原理

由于 P 的矢量性，其耦合关联的强度叠加遵循其矢量合成定理，现写成如下矢量相加形式：

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 + \cdots + \mathbf{P}_n . \qquad (1)$$

为此，可利用耦合关联场的强度叠加原理来表达出反铁磁相与超导相之间的相互耦合作用。

2.3 凝聚态物质间的耦合关联强度计算

若在空间(x, y, z)的短程有序关联场强度 P(x, y, z)分布不均时，则在该短程关联作用下所凝聚形成的离子数密度ρ(x, y, z)也将会不一致。

现假设二者之间存在着如下简单的正比关系，即：

$$P(x, y, z) = \alpha\ \rho\ (x, y, z), \qquad (2)$$

其中α为一比例系数，与材料媒质有关。

而对于铜氧化物高温超导体而言，其超导导电层只发生在二维的 CuO_2 平面。而在 CuO_2 平面内，CU 离子之间通过 O 离子超交换而存在着强烈的短程序关联，其 CU 离子的凝聚数密度便反映了该局域空间内的耦合关联强度。

因此，在铜氧化物超导体中，其（2）式可简化成如下形式:

$$P(x, y) = \alpha\ \rho\ (x, y). \qquad (3)$$

其中ρ (x, y)代表了 CuO_2 面内参与耦合关联的 CU 离子数密度，即参与耦合关联的 CU 位格点数密度。

（3）式即是表明：在铜氧化物超导体中，导电层 CuO_2 面内任一点处的耦合场强度和该点的凝聚态 CU 位格点数密度成正比。

该物理意义可与静电学中“带电导体表面任一点处的场强和该点的电荷面密度成正比”理论相对应和类比。

2.4 耦合关联能量体密度概念的引入

现仍将超导材料中的耦合关联场与电磁场类比，引入与电磁场能量体密度 W_e、W_m 相对应的耦合关联场能量体密度概念，记为 W_g。

我们知道, 在电磁学中, 电场和磁场的能量体密度分别为[8]：

$$W_e = \frac{1}{2}\varepsilon E^2, \quad W_m = \frac{1}{2}\mu H^2$$

其中ε和μ分别为媒质的介电系数和磁导率。

为此，通过类比，可假设耦合关联场能量体密度也具有如下对应形式，即：

$$W_g = \frac{1}{2}\beta P^2, \qquad (4)$$

其中β为一比例系数，与材料媒质有关。

联合（3）（4）式可知，在高温超导体中，其耦合关联场能量体密度W_g和凝聚态物质的数密度ρ具有如下关系式：

$$W_g = \frac{1}{2}\alpha^2\beta\rho^2, \qquad (5)$$

令

$$k = \alpha^2\beta, \qquad (6)$$

则：

$$W_g = \frac{1}{2}k\rho^2, \qquad (7)$$

其中 k 为一比例系数，与材料媒质有关。

2.5 强耦合关联场的相干共振现象与能量重新分布规律

由于凝聚态物质的强耦合关联都可归结于离子间的电磁场作用和物质波之间的相互作用，其能量传播均具有波动性，因此在一定条件下可表现出波所特有的相干现象。

而在铜氧化物高温超导体中，其超导相和反铁磁相之间的涨落过程存在着强耦合关联的作用，由于二者的叠加涨落具有同时性与宏观有序性，因此可将二者视为频率相同、振动方向相同及周相相同的相干波。

因此，当强耦合关联场之间存在相干性时，可产生相干共振现象，随之能量出现重新分布。

若设超导相关联场为 P_1，反铁磁相关联场为 P_2，将二者的相干合成能量体密度值记为W_d，则：

$$W_d = \frac{1}{2}\beta(P_1 + P_2)^2, \qquad (8)$$

显然在数值上：

$$W_d > \frac{1}{2}\beta P_1^2 + \frac{1}{2}\beta P_2^2,$$

即关联场 P_1、P_2的叠加耦合能量出现了重新分布。

而对于不相干场的能量体密度 Wa 、 Wb 的合成值 Wc，则具有如下表达形式：

$$Wc = Wa + Wb \ .$$

即不相干场的能量体密度合成仅为数值的代数相加总和。

3. 建立高温超导理论的途径

3.1 利用能量体密度概念建立理论

在高温超导体中，其相分离的出现表明存在着多种能量的相互竞争并取得平衡。

为此，要建立高温超导理论，应从能量的角度来表达不同性质能量的竞争方式与数值的大小关系。

由于超导电流均匀流动在一维的导电层面中，因此，在垂直于电流矢量方向的任一截面中，应具有相同的能量作用方式。为描述这种能量的空间可平移性，则采用能量体密度的概念来建立其动力学理论。

3.2 各种能量因素的能量体密度表达式

在高温超导体中，存在着如下五种重要的能量因素：

（Ⅰ）反铁磁背底相：

设承载超导相载流子凝聚的反铁磁背底相的 CU 位数密度为ρ_s，所对应的关联场能量密度设为W_b，则据（7）式可知：

$$W_b = \frac{1}{2} k \rho_s^2 \,, \qquad (9a)$$

（Ⅱ）超导叠加相：

在反铁磁背底相的基础上叠加着超导相，设表征为超导相空穴的 CU 位格点数密度为$\Delta\rho_s$，则二者叠加所形成的总密度为（$\rho_s + \Delta\rho_s$）。设总密度所对应的强关联场能量体密度为W_d，由于二者耦合关联场的相干性，则据（8）、（3）、（6）三式可知：

$$W_d = \frac{1}{2} k \left(\rho_s + \Delta\rho_s \right)^2 , \qquad (9b)$$

（Ⅲ）条纹涨落相：

相分离的宏观表现形式为条纹相，虽然某些超导材料的静态条纹相宏观表现非常不明显，但在超导电流的形成过程中，因载流子凝聚的动态运输与迁移将表现出动态有序的涨落过程，形成动态条纹相或近似条纹相，现称其为条纹涨落相。

由于条纹涨落相的形成即是超导相在反铁磁相基础上的动态叠加与随之迁移，则形成了能量的持续运输。其运输的能量体密度即为超导叠加相与反铁磁相的能量体密度之差。

设条纹涨落相的能量体密度为W_Z，则：

$$\begin{aligned} W_Z &= W_d - W_b \\ &= \frac{1}{2} k \left[\left(\rho_s + \Delta\rho_s \right)^2 - \rho_s^2 \right], \end{aligned} \qquad (9c)$$

由于条纹涨落相的能量来自超导相的动态涨落与迁移过程，因此在涨落过程中将形成动态迁移的耦合能隙，以对载流子产生新的持续耦合与凝聚作用，这是高温超导体实现载流子配对的最重要手段，也是高温超导体区别于 BCS 低温超导体的最基本特征。

（Ⅳ）热能：

热能总是使载流子趋向于作无规则的热运动，不利于高温超导相的形成与稳定。在宏观概念中用温度概念 T 来描述。

下面将求出与温度 T 相关的热能体密度，记为W_t。

根据热学理论中能均分定理可知[9]，1mol 固体共有的热振动能量，即摩尔内能为 3RT，其中 R 为气体常数。

设作为研究对象的固体有 N 摩尔晶体粒子，体积为 V，则该固体热振动总能量为 3NRT，则单位体积内的固体热振动能量为 3NRT/V，即等于热能体密度W_t。其中 N/V 表示单位体积内该固体所含的摩尔数，当一定体积的固体选定后，其 N/V 可视为一平均定值，现记 γ＝3RN/V，则 γ 也相应为一定值，则固体热振动所对应的热能体密度W_t可记为：

$$W_t = \gamma T \ , \tag{9d}$$

其中系数 γ＝3RN/V，为一与材料相关的数值。

（V）长程库仑电势能：

在相分离的形成过程中，其载流子与载流子之间的凝聚能还必须克服相互之间的长程库仑电势能。设相分离形成之前，长程电势能 A 平均分布在材料空间 V 内，其长程电势能 A 在数值上即等于所存储的载流子电场能。

设该长程电势能的能量体密度为W_p，则：

$$W_p = \frac{A}{V} . \tag{9e}$$

由于掺杂杂质对超导材料母体内的电场能 A 及母体空间体积 V 均影响甚微，因此可将能量体密度值W_p视为一定值，其具体数值与材料有关。

4. 描述高温超导机制的动力学基本方程

本文将高温超导的形成机制用如下两点规律加以描述：

（I）保证相分离的出现。

从能量的角度描述为：超导叠加相的强关联能量必须大于反铁磁关联、长程电势能及热能等能量之和，从而保证超导相的形成。

用数学语言表达为：

$$W_d > W_b + W_t + W_p \ , \tag{10}$$

因:

$$W_Z = W_d - W_b ,$$

因此（10）式可改写成：

$$W_Z > W_p + W_t , \tag{11}$$

即：

$$\frac{1}{2}k\left[(\rho_S+\Delta\rho_S)^2-\rho_S^2\right]>W_P+\gamma T, \qquad (12)$$

其（11）式或（12）式可表述成： 条纹涨落相对载流子的耦合凝聚能必须大于长程电势能及热能等能量之和，以保证超导相的动态生成与稳定。

（Ⅱ）条纹相的涨落形成超导，但必须以不破坏反铁磁相背景的强关联为前提，因为反铁磁相是超导相赖以存在的基础。

从能量的角度描述为：反铁磁相关联的能量必须大于条纹涨落相关联、长程电势能及热能等能量之和，从而保证了反铁磁相背景的动态稳定。

用数学语言表达为：

$$W_b>W_Z+W_P+W_t\ , \qquad (13)$$

将（13）改写成：

$$W_Z<W_b-W_P-W_t\ , \qquad (14)$$

即：

$$\frac{1}{2}k[(\rho_S+\Delta\rho_S)^2-\rho_S^2]<\frac{1}{2}k\rho_S^2-W_P-\gamma T, \qquad (15)$$

联合（12）、（15）式可知：

$$\frac{1}{2}k\rho_S^2-W_P-\gamma T>W_P+\gamma T\ , \qquad (16)$$

化简（16）式，则：

$$\frac{1}{2}k\rho_S^2>2W_P+2\gamma T\ , \qquad (17)$$

（17）式为反铁磁相形成的必要条件。

综上述可知，在忽略电—声子作用的情况下，其高温超导机制的动力学基本方程可归纳成如下三个不等式：

$$\begin{cases}\frac{1}{2}k[(\rho_S+\Delta\rho_S)^2-\rho_S^2]>W_P+\gamma T\ , & (12)\\ \frac{1}{2}k[(\rho_S+\Delta\rho_S)^2-\rho_S^2]<\frac{1}{2}k\rho_S^2-W_P-\gamma T, & (15)\\ \frac{1}{2}k\rho_S^2>2W_P+2\gamma T\ , & (17)\end{cases}$$

由于在研究过程中，通常以载流子（空穴）浓度 x 为直接参量加以研究，因此可设：

$$\rho_n=\rho_S+\Delta\rho_S,$$

则：

$$\Delta\rho_s = x\rho_n$$
$$\rho_s = (1-x)\rho_n$$

根据上述定义可知，其总密度ρ_n即对应着单位面积的 CuO_2面内 CU 位格点的总数，其中可巡游迁移的 CU 位格点数（即空穴数）为$\Delta\rho_s$，则其比值 X（即$\Delta\rho_s/\rho_n$）即代表了每个 CuO_2面的空穴数，即当前超导物理学中所定义的载流子（空穴）浓度。

将上述定义代入（12)、(15)、(17）式，则描述高温超导机制的动力学基本方程可表述成如下另一种形式，即：

$$\begin{cases}\frac{1}{2}k(1-x)^2\rho_n^2 < \frac{1}{2}k\rho_n^2 - W_P - \gamma T, & (18)\\ k(1-x)^2\rho_n^2 > \frac{1}{2}k\rho_n^2 + W_P + \gamma T, & (19)\\ \frac{1}{2}k\rho_n^2 > 3W_P + 3\gamma T, & (20)\end{cases}$$

下面，我们将以此（18)、(19)、(20）不等式方程组为基础，对高温超导特征作出全面分析。

5. 欠掺杂与过掺杂现象的数学推导

即是研究当总密度ρ_n被视为一定值时，其参量 T 与载流子浓度 x 之间的变化关系。

当ρ_n一定时，设在（20）式成立的前提下，可将（18)、(19）式分别整理成如下形式：

$$\begin{cases}T < -\frac{1}{2\gamma}k\rho_n^2(1-x)^2 + \frac{1}{\gamma}(\frac{1}{2}k\rho_n^2 - W_P), & (18)\\ T < \frac{1}{\gamma}k\rho_n^2(1-x)^2 - \frac{1}{\gamma}(\frac{1}{2}k\rho_n^2 + W_P), & (19)\\ (0 \leqslant x \leqslant 1,\ T \geqslant 0)\end{cases}$$

现以载流子浓度 x 为横轴坐标，温度 T 为纵轴坐标而建立直角坐标系，则不等式方程（18)、(19）在 0≤x≤1、T≥0 的条件下同时成立的区域仅为下图 2 所示的斜阴影区域 AHB。

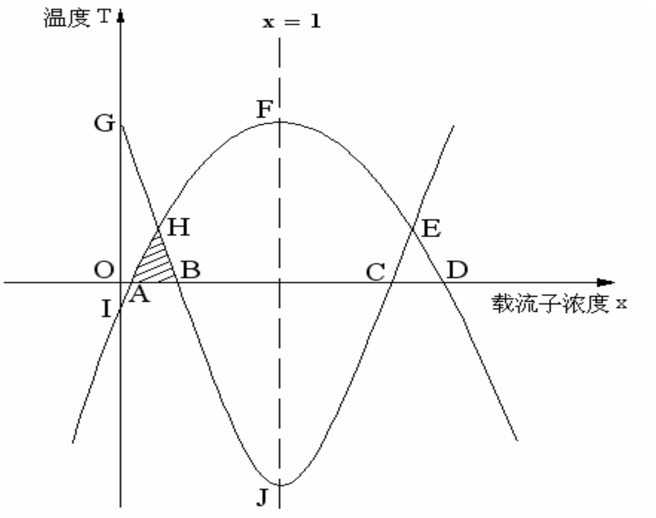

图 2　温度 T 与载流子浓度 x 之间的变化关系 (T — x 基本相图）

AHB 斜阴影区域便是可实现高温超导的区域。

其 A、B、H 三点的坐标值分别为：

$$A:\left(1-\sqrt{1-\frac{2W_p}{k\rho_n^2}},\quad 0\right)$$

$$B:\left(1-\sqrt{0.5+\frac{W_p}{k\rho_n^2}},\quad 0\right)$$

$$H:\left(\frac{3-\sqrt{6}}{3},\quad \frac{k\rho_n^2}{6\gamma}-\frac{W_p}{\gamma}\right)$$

由图 2 可知,包容曲线 AHB 上所对应 T 值就是实现高温超导转变的临界温度值,记为 Tc。因此在区域 AHB 中，当温度低于临界温度 Tc 时，该材料便可实现向高温超导的转变。

由图 2 可知，AH 段为欠掺杂段，该段的 Tc 值随载流子掺入浓度 x 的增加而升高；HB 段为过掺杂段，该段的 Tc 值随载流子掺入浓度 x 的继续增加而降低以至为零。这即是载流子的欠掺杂与过掺杂现象。

6. T—x 基本相图中的物理规律剖析

在忽略电—声子作用的情况下，其温度 T 与载流子浓度 x 的关系图称其为 T—x 基本相图，即图 2 所给出的相图。

由图 2 可知，其 T—x 基本相图能揭示出如下规律：

（Ⅰ）、载流子浓度存在着欠掺杂与过掺杂规律。

（Ⅱ）、GH 段临界能隙即是欠掺杂区中可观察到的赝能隙。随着载流子浓度 x 的继续增加，GH 段的赝能隙曲线将平滑过度成过掺杂区的 HB 段超导能隙。

由于赝能隙曲线 GH 段和超导能隙 HB 段是同一条平滑曲线的两部分，二者有着共同的物理起源，即均来自不等式方程（15）式或（19）式的解。该能隙为条纹涨落相、长程库仑势、

热能振动等三者共同和反铁磁背底关联竞争的竞争序。

（III）、欠掺杂区的超导能隙 AH 段随着载流子浓度 x 的继续增加而变成过掺杂区的非超导能隙 HF 段。二者同样有着共同的物理起源，即均来自不等式方程（12）式或（18）式的解。该能隙为长程库仑势、热能振动等二者共同和条纹涨落相竞争的竞争序。

正由于 HF 段来自超导能隙 AH 段的自然延伸，因此在低于 HF 能隙温度的非超导区域内（居于 HF 曲线下方及 HB 上方之间的区域），仍有超导电子对的瞬时生成，但该区域内超导电子对赖以生存的反铁磁背底相不稳定，因此超导电子对无法稳定维持。只有在反铁磁背底相稳定的区域（即 HB 曲线下方），才能形成稳定的超导电子对与超导电流。随着 HB 曲线在过掺杂区内的陡然下降，其反铁磁背底相的短程序稳定性也随之急剧下降，并开始逐步消失。

（Ⅳ） 由图 2 可知，H 点为 GB 曲线和 AF 曲线的交叉点，以 H 点为分界点，每条曲线的两端构成不同性质的能隙，因此，H 点即是实验中观察到的量子临界点，该点所对应的载流子浓度为 $x=\frac{3-\sqrt{6}}{3}=0.1835$，与“量子临界点居于 0.19 附近”的实验统计规律相吻合。

（Ⅴ）在不考虑电—声子作用的情况下，量子临界点 H 即是载流子浓度的最佳掺杂点，此时 Tc 取得最高值。但在后面章节将看到，若考虑电—声子的实际作用后，最佳掺杂点与量子临界点将出现分离，其最佳掺杂点相对左移，即小于量子临界点浓度 0.1835，而此时 Tc 取得的最高值也相对略微上升。具体分析详见后续有关新同位素效应的章节推导。

（Ⅵ）由（20）式可知，$k\rho_n^2>6W_P$ 是超导形成的基本前提，因此当 $k\rho_n^2>>W_P$ 时，$\frac{W_p}{k\rho_n^2}\to 0$，此时在 T—x 基本相图中，点 A、B 取得坐标极限值：

$$x_{Amin}=0,$$

$$x_{Bmax}=1-\sqrt{0.5}=0.2929;$$

即在忽略通常呈现较弱影响力的电—声子作用和大气压力作用的情况下，可形成超导区域的载流子浓度 x 存在着极限范围，即：

$$x\in(0,\ 0.2929)。$$

当电—声子作用和高压作用的共同影响力非常强大时，其载流子浓度下限 x＝0 时也有可能实现超导，即此时：

$$x\in[0,\ 0.2929),$$

详见后面章节的推导。

7. 反铁磁关联加强效应的数学推导

可分成两种情况来研究反铁磁关联的加强效应。

（Ⅰ）第一种情况：当载流子浓度 x 保持不变时，研究其温度 T 与总密度 ρ_n 的关系。

该种情况可直接以图 2 所示的 T-x 基本相图加以研究。在图 2 中，当 ρ_n 增大至 ρ_n' 时（$\rho_n' > \rho_n$），A 点左移至 A′，B 点右移至 B′，H 点垂直上移至 H′，如下图 3 所示：

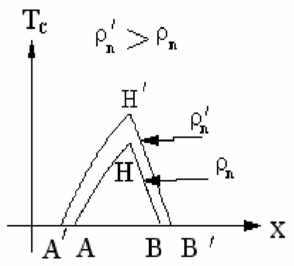

图 3 总密度值 ρ_n 发生变化时的 T_c—x 曲线

由图 3 可知，当载流子浓度 x 保持不变时，增加总密度 ρ_n 值，则反铁磁相密度及其关联随之增强，此时超导临界温度曲线上移，且可实现超导的载流子浓度区域也被拓宽。

由于当载流子浓度 x 保持不变时，若总密度 ρ_n 值增加，其反铁磁相关联增强的同时，其载流子数密度也随之增加。下面研究更基本的第二种情况，即当载流子数密度不变的前提下，研究其反铁磁相关联的加强效应。

（Ⅱ）第二种情况：当载流子数密度 $\Delta\rho_s$ 被视为一定值时，研究其参量 T 与反铁磁背景密度 ρ_s 之间的关系。

此时宜选用（12）、（15）、（17）式方程组，以便于研究。

当 $\Delta\rho_s$ 为定值时，T 是变量 ρ_s 的函数，其函数关系可由（12）、（15）、（17）式整理成如下形式：

$$\begin{cases} T < \dfrac{K}{2\gamma}\left(2\Delta\rho_s\rho_s + \Delta\rho_s^2 - \dfrac{2W_p}{K}\right) \\ T < \dfrac{K}{2\gamma}\left(\rho_s^2 - 2\Delta\rho_s\rho_s - \Delta\rho_s^2 - \dfrac{2W_p}{K}\right) \\ T < \dfrac{K}{2\gamma}\left(\dfrac{1}{2}\rho_s^2 - \dfrac{2W_p}{K}\right) \end{cases}$$

现以 ρ_s 为 X 轴，T 为 Y 轴建立直角坐标系，则不等式(12)、(15)、（17）同时成立并可实现高温超导的区域为下图 4 中所示的斜阴影 ACG 区域。

/ K

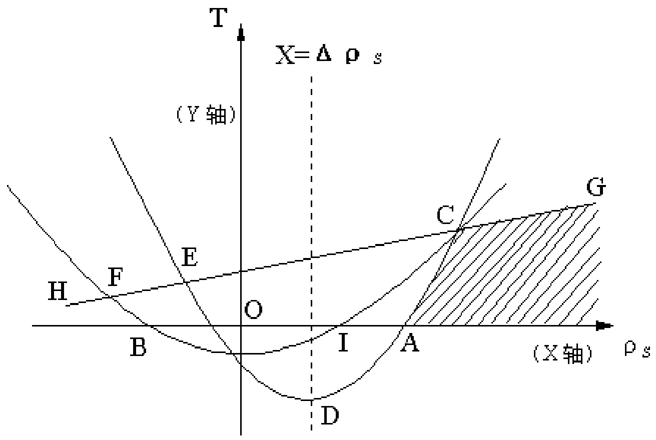

图 4 温度 T 与反铁磁背景相密度 ρ_s之间的变化关系

在图 4 中，其边界线 ACG 上所对应的 T 值就是实现高温超导转变的临界温度值 Tc，在该区域内，当低于临界温度 Tc 时，其材料便可实现向超导的转变。

图 4 表明，当 $\Delta\rho_s$值一定时，增强其反铁磁相密度 ρ_s，对提高超导临界温度 Tc，则始终是有利的。这便是反铁磁关联的加强效应。

通过计算可知，图 4 中的 C 点横坐标为：

$$\rho_s = (2+\sqrt{6})\,\Delta\rho_s,$$

则 C 点所对应的载流子浓度为：

$$x_C = \frac{\Delta\rho_s}{\rho_s + \Delta\rho_s} = \frac{\Delta\rho_s}{(2+\sqrt{6})\,\Delta\rho_s + \Delta\rho_s} = 0.1835$$

即 C 点为前述的量子临界点 x＝0.1835，在忽略电—声子作用的情况下，C 点也同时对应于载流子浓度的最佳掺杂点；而此时 AC 段为过掺杂区，CG 段为欠掺杂区。由图 4 可知，因 AC 曲线的增长斜率明显大于 CG 直线的增长斜率，即是表明，其过掺杂区内的反铁磁关联强度变化对 Tc 的影响程度将比欠掺杂区内反铁磁关联强度变化的影响程度更显著。

8. 电子—声子作用与同位素效应的数学推导

在前面的论述中只考察了条纹涨落相对超导形成的凝聚作用，而未涉及电子在晶格中运动后引起晶格振荡畸变所产生的电子—声子作用。但晶格振荡畸变所产生的电子—声子作用在高温超导体中仍然客观存在，因此，其完整的高温超导理论必须对电子—声子作用的影响行为予以考虑[10]。

下面，我们将给出电子—声子作用对高温超导的影响行为。

（Ⅰ）第一方面：由于电子—声子作用表征为载流子之间的吸引力，因此进一步加强了超导相浓度的凝聚。

（Ⅱ）第二方面：由于电子—声子作用是电子运动形成的晶格畸变过程，因此对反铁磁背底关联起着破坏性扰动作用，即不利于反铁磁关联的稳定。

由此可知，电子—声子作用与条纹涨落相的作用相一致，为表达上述电子—声子作用对高温超导的两种影响效应，现以数学方式引入（11）、（14）式。

设电子—声子作用的能量体密度为 W_S，则用（$W_Z + W_S$）之和直接替换（11）、（14）式中的 W_Z 即可。即在考虑电子—声子作用的情况下，则全面描述高温超导动力学的方程为如下二式：

$$\begin{cases} W_Z + W_S > W_p + W_t\,, & (21) \\ W_Z + W_S < W_b - W_p - W_t\,. & (22) \\ (W_b > 2W_p + 2W_t)\,. \end{cases}$$

现仍用总密度 ρ_n 和载流子浓度 x 之间的关系来表述 W_Z、W_b，则上述（21）、（22）式将转化成 T—x 关系的如下方程不等式：

$$\begin{cases} T < -\frac{1}{2\gamma} k \rho_n^2 (1-x)^2 + \frac{1}{\gamma}\left(\frac{1}{2} k \rho_n^2 - W_P\right) + \frac{1}{\gamma} W_S\,, & (23) \\ T < \frac{1}{\gamma} k \rho_n^2 (1-x)^2 - \frac{1}{\gamma}\left(\frac{1}{2} k \rho_n^2 + W_P\right) - \frac{1}{\gamma} W_S\,, & (24) \\ (0 \leqslant x \leqslant 1,\ T \geqslant 0) \end{cases}$$

即（23）式相对于（18）式仅上移了 $\frac{W_S}{\gamma}$ 个单位，而（24）式相对于（19）式仅下移了 $\frac{W_S}{\gamma}$ 个单位。

将（23）、（24）式联立所允许的超导区域标注为如下 T—x 坐标示意图中的 A′ B′ H′ 阴影区域，如图 5 所示：

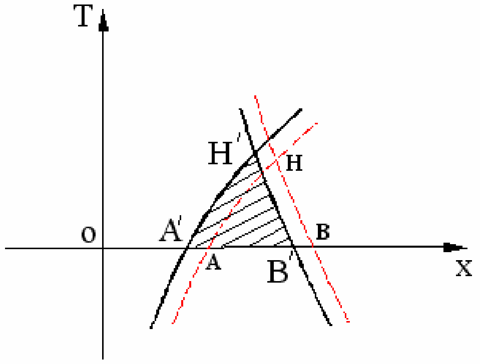

图 5　在包含电子—声子作用的基础上，其温度 T 与载流子浓度 x 之间的变化关系。

则 A′、B′、H′ 三点的坐标值分别为：

$$A'：(1-\sqrt{1-\frac{2(W_p-W_s)}{k\rho_n^2}}，0)$$

$$B'：(1-\sqrt{0.5+\frac{W_p+W_s}{k\rho_n^2}}，0)$$

$$H'：(1-\sqrt{\frac{2}{3}+\frac{2W_s}{k\rho_n^2}}，\frac{k\rho_n^2}{6\gamma}-\frac{W_p}{\gamma}+\frac{W_s}{3\gamma})$$

现将未考虑电子—声子作用的高温超导区域 ABH（如图 2 坐标所示）以红色虚线形式标注于图 5 中以供比较，由此可得出如下结论：

（Ⅰ）在电子—声子作用和条纹涨落相作用的共同参与下，其实际存在的高温超导区域 A′B′H′ 相对于忽略电子—声子作用后的理论计算区域 ABH 左移；当电子—声子作用越强，则实际存在的高温超导区域（A′B′H′）左移的程度越强。

即是表明，电子—声子作用的加强有利于欠掺杂区的 Tc 值提高，而过掺杂区的 Tc 值却相对下降。反之也成立，即电子—声子作用的减弱将使欠掺杂区的 Tc 值相对下降，而过掺杂区的 Tc 值却会相对升高。

（Ⅱ）由图 5 可知，当电子—声子作用出现加强或减弱，且能量体密度变化量为 ΔW_s时，其欠掺杂区和过掺杂区的 Tc 曲线的垂直变化值为 $\frac{\Delta W_s}{\gamma}$；而此时最佳掺杂点 H′ 所对应的 Tc 值出现升高或下降的变化值仅为 $\frac{\Delta W_s}{3\gamma}$。

即是表明，电子—声子作用强度的改变（比如同位素效应）对最佳掺杂组份的影响较小，而对欠掺杂区和过掺杂区组份的影响要相对大一些。

（Ⅲ）由于电子—声子作用的能量体密度概念 W_s 可用单位体积内的电子—声子作用能量来表述，因此，设晶格的电子—声子作用频率为 υ，则晶格的声子总能量为 hυ，其晶格体积设为 V_C，则平均分布在晶格体积 V_C 内的声子能量体密度 W_s 为：

$$W_s=\frac{h\upsilon}{V_C}，\qquad (25)$$

由此可知，电子—声子作用对高温超导 Tc 值的影响程度只取决于 W_s 值，但 W_s 值不仅与晶格畸变的声子频率 υ 有关，而且还与晶格的体积 V_C 有关。

而同位素质量的变化可改变晶格的声子频率 υ，外界压力的变化可改变晶格体积 V_C，二者均可引起电子—声子作用的强度改变而使 Tc 值改变。

因此，将表现为同位素效应与压力效应之间存在着密切的联系，并同时遵循着相同的电子—声子作用规律。

（Ⅳ）由于通常情况下W_S偏小，一般视为$W_S<W_P$，则此时超导区域 A′B′H′居于坐标原点的右端，即此时实现高温超导的最低掺入载流子浓度$X_{min}>0$，即如图 5 所示。

但由于可通过降低同位素质量和减小晶格体积来同时提高W_S值。若W_S值满足如下取值范围：

$$W_P < W_S < \frac{1}{6}k\rho_n^2,$$

则在坐标原点时($X_{min}=0$) 即可实现超导。而此时最佳掺杂点 H′仍居于坐标图的第一象限。该种情况所对应的超导区域如图 6 所示的 OA″H′B′斜阴影区域：

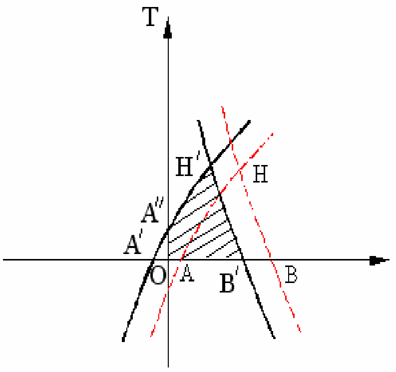

图 6 掺入载流子浓度 x=0 时可实现超导的可能性相图

如果W_S的取值在如下范围内：

$$\frac{1}{6}k\rho_n^2 < W_S < \frac{1}{2}k\rho_n^2 - W_P,$$

则此时的可超导区域变成如下图 7 所示的 0H″B′斜阴影区域，在掺入载流子浓度 x＝0 时取得相对最高 Tc 值（即 H″点）：

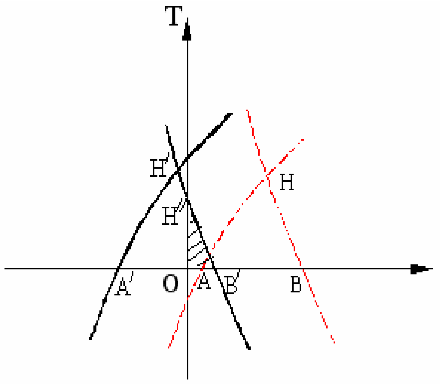

图 7 掺入载流子浓度 x=0 时取得相对最高 T_c 值的可能性相图

其图 7 中 H″点的坐标为：

$$H''\text{：}\left(0, \frac{k\rho_n^2}{2\gamma} - \frac{W_P}{\gamma} - \frac{W_S}{\gamma}\right)$$

如果W_S的取值在如下范围内：

$$W_S \geq \frac{1}{2}k\rho_n^2 - W_P,$$

则图 7 中的 B′ 点与坐标圆点重合或进入坐标圆点左侧的负轴上，此时超导现象已完全消失。

（Ⅴ）上述图 5、图 6、图 7 讨论了电子—声子作用和条纹涨落相共同作用下的三种可能性超导区域。

但不管在任意一种超导区域状态下，其条纹涨落相作用引发的 AH 曲线能隙和 HB 曲线能隙依然客观存在。根据图 2 的 T—x 基本相图分析可知，AH、HB 曲线所对应的能隙分布只与总密度参数ρ_n及长程库仑电势W_P有关，而与电子—声子作用的强弱本身无关。

又因为 AH、HB 能隙曲线相交于量子临界点 H，且点 H 对应的载流子浓度为一定值（x＝0.1835）。因此表明，该量子临界点也本身与电子—声子作用的强弱无关，它将始终存在于高温超导相图中的垂线 x＝0.1835 上。

9. 压力效应与数学分析

本文认为，压力主要通过晶格体积的整体改变或局部改变而影响到超导面的有效总密度ρ_n和载流子浓度 x 以及电子—声子作用的能量体密度W_S，从而影响到具体的高温超导临界温度值 Tc 和实现超导的载流子浓度范围。

但压力如何影响ρ_n、x 和W_S三参数，这取决于超导材料的结构类型。

由于铜氧化物超导体分为空穴型超导体和电子型超导体，其二者结构是不一致的。迄今为止，由空穴导电的高温超导体（p-型超导体）都是在金字塔形或八面体形 CuO_2面类型的结构中发现的，而电子导电的高温超导体（n-型超导体）都是在正方平面形 CuO_2面类型的结构中发现的[11]。

因此，根据空穴型超导体和电子型超导体的结构不同，本文认为，当在压力状态下，其金字塔形或八面体形 CuO_2面类型的结构在垂直投影面即超导面上的有效总密度ρ_n和载流子浓度 x 及电子—声子作用的能量体密度W_S等三数值均增大；而在压力状态下，其正方平面形 CuO_2面结构在垂直投影面即超导面上的有效总密度ρ_n和载流子浓度 x 及电子—声子作用的能量体密度W_S等三数值保持不变，或在压力平衡状态下平面形超导面有可能扩张，即三参数值会略微变小。

而根据前面章节的数学推导与论述可知：

（Ⅰ）总密度ρ_n的数值变化，使超导临界温度的 Tc 曲线在 Tc—x 相图的垂直方向上形

成移动。

（Ⅱ）当总密度ρ_n值一定时，其载流子浓度 x 的数值变化，将使对应的超导临界温度值 Tc 相对上升或下降，并取决于载流子浓度 x 居于欠掺杂区或过掺杂区。

（Ⅲ）当总密度ρ_n、载流子浓度 x 值均一定时，其电子—声子作用的能量体密度W_S值变化，也将使对应的超导临界温度值 Tc 作相对上升或下降，并同样取决于载流子浓度 x 居于欠掺杂区或过掺杂区。

而在压力状态下，上述三参数（ρ_n，x，W_S）均同时出现变化，因此，其压力效应将是（Ⅰ)、(Ⅱ)、(Ⅲ）三种相对独立效应的复合变化效应。

而在上述（Ⅰ)、(Ⅱ)、(Ⅲ）三种相对独立效应中，其第（Ⅰ）种效应，即总密度ρ_n值变化所直接引起的 Tc 垂直变化效应最为直接显著，其它（Ⅱ)、(Ⅲ）种变化均以此为基础。

因此根据上述效应特征，并结合不同超导材料的结构类型，可推导出如下结论，即：

在压力状态下，具有金字塔形或八面体形 CuO_2 面类型的空穴导电型高温超导体（即 p-型超导体）因总密度ρ_n值增大，则 Tc 值也通常随之上升；而具有正方平面形 CuO_2 面类型结构的电子导电型高温超导体（即 n-型超导体）因总密度ρ_n值几乎保持不变或略微减小，则 Tc 值也几乎不变或变小。

如果某空穴型超导材料在高压状态下其电声子能量密度改变显著并持续增大，则据图 5、图 6、图 7 所揭示的演化规律可知，当 Tc 增大到某极限值后将反转为下降趋势。

10. 结论

综全篇论文可知，本篇论文能够很好地解释当前铜氧化物高温超导体的所有重要实验事实。

根据全篇论文内容，可总结出如下六点结论与观点：

（Ⅰ）本文所给出的高温超导动力学方程揭示出了铜氧化物高温超导体的竞争序动力学结构，该结构是实现高温超导机理的关键，也同时是高温超导现象呈现复杂的原因。

（Ⅱ）从本文可知，动态条纹涨落相的可迁移凝聚能是铜氧化物高温超导体中实现载流子配对的主导能量。电声子作用能对载流子配对的贡献通常仅占次要因素。

（Ⅲ）从本文可知，超导 CuO_2 面的总 CU 位格点数密度ρ_n、载流子（空穴）浓度 x、电声子作用能量密度W_S是影响铜氧化物超导临界温度值 Tc 的三个因素。

（Ⅳ）在铜氧化物高温超导相图中，其实现超导区域的载流子浓度存在着理论极限范围值：$x \in [0, 0.2929)$；并在“0.19 ”附近存在着量子临界点，其精确值为 x＝$\frac{3-\sqrt{6}}{3}$＝0.1835。

（V）在通常状态（非高压状态）下，尽可能增强其超导材料的反铁磁背底关联（对应于超导 CuO_2 面的总密度 ρ_n 值提高），并选择相对应的最佳掺入载流子浓度 x，则有利于高温超导临界温度 Tc 的提高。这是制作高 Tc 超导材料的有效理论途径。

（Ⅵ）如果让 Tc 取得室温值或更高温度数值，则本文理论中的三动力学参数（ρ_n，x，W_S）以及与材料相关的三常数（W_F，k，γ）如何取得优化，并如何发现或制备出相对应的实际材料，并如何取得进一步的工业化生产与应用，这将是高温超导研究与发展的下一步趋势，而本篇论文已建立起了坚实的理论基础，将具有里程碑的意义。

参考文献

[1] 赵柏儒.高温超导体中的相分离和电荷有序[J].物理，1998，27（12）：705-706

[2] 赵柏儒.高温超导体中的相分离[J].物理，1998，27（4）：204

[3] 韩汝珊. 高温超导体中的正常态能隙[J].物理，1998，27（1）：19-21

[4] 方磊，许业文，徐政.高温超导的物理进展[J].同济大学学报（自然科学版），2005，33（7）：870

[5] 董晓莉. La_2CuO_4 体系中的相分离及相关特性的实验研究[D].博士论文，长沙：湖南大学，2000

[6] 陈羽.高 Tc 铜氧化物超导体中的非传统同位素效应[R].第八届全国高温超导学术研讨会论文，上海：上海大学，2005

[7] 韩翠英，方芳，解思深. $Gd_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_{7-y}$ 高温超导体压力效应的研究[J].物理学报，1994，43（10）：1407

[8] 程守洙，江之永.普通物理学 2[M].北京：高等教育出版社，1982，247

[9] 张玉民.热学[M].北京：科学出版社，2000

[10] 戴闻，王楠林.高温超导体中的电-声子相互作用[J].物理，2002，31（4）：261

[11] 任清褒.高温超导体正常态的输运性质.丽水师范专科学校学报[J].2001，23（2）：24-25

The physical mechanism and dynamic theory of cuprate superconductors

Gu jia-pu

Chongqing，China （400039）

Email:gip02565@yahoo.com.cn

Abstract：In this paper，the author takes the coupling correlations in cuprate superconductors to compare with electromagnetic interaction， introduces two important concepts about the coupling intensity and the coupling energy density;

And introduces supposition to describe the mathematical relation between coupling intensity and the condensation density。This article has analyzed the many kinds of energy in the superconducting phase separation， and has deduced the dynamic equation of competitive order in the cuprate superconductors。Thus establishes the physical mechanism of high-Tc superconductivity。This theory can use the mathematics equation to deduce some important experimental phenomenon，for example，the weak doping and overdoping phenomenon、pseudogap phenomenon、quantum phase transition point nearby 0.19、antiferromagnetics reinforcement effect、unusual isotope effect、pressure effect，This article has made the mathematical analysis systematically。

Keywords: coupling correlation、high-temperature superconductivity、dynamic theory